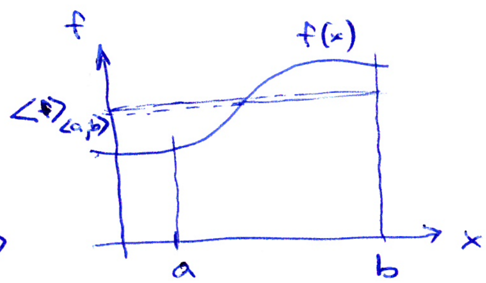
Monte Carlo integrace

- výhody metody Monte Carlo se projeví až u vícedimenzionálních integrálů, ovšem pro jednoduchost si metodu ilustrujeme na jednorozměrných integrálech, pro které je vždy výhodnější použít standardní metody numerické integrace, jako jsou Newtonovy-Cotesovy vzorce nebo Gaussova kvadratura

- na integraci se lze dívat jako na průměrování funkce na určitém intervalu, např.

$$I = \int_0^1 f(x)\,dx \approx \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)$$



pokud x_i jsou náhodné body s rovnoměrným rozdělením na $\langle 0,1\rangle$

nebo obecněji

$$\boxed{I = \int_0^1 f(x)\,dx \approx \underbrace{\frac{(b-a)}{N}}_{\text{faktor } h=(b-a)/N} \sum_{i=1}^{N} f(x_i)}$$

, kde nyní $x_i \in \langle a,b\rangle$ jsou opět rovnoměrně rozdělené

obdobný integračnímu kroku u Newton-Cotesových vzorců

„míra na daném intervalu"

- protože x_i je náhodná proměnná, považujeme i $f(x_i)$ za náhodnou veličinu a podle centrální limitní věty dostaneme pro pravděpodobnou chybu

$$\boxed{r \approx 0{,}67\,\sigma_I = 0{,}67\,\frac{(b-a)\,\sigma_f}{\sqrt{N}}}$$

kde σ_f^2 je variance funkce $f(x)$, kterou můžeme během výpočtu odhadnout jako

$$\sigma_f^2 \approx \langle f^2\rangle - \langle f\rangle^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)^2 - \left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(x_i)\right)^2$$

- pro d-dimenzionální integrál použijeme obdobně

$$\int_\Omega f(x_1,\dots,x_d)\,dx_1\dots dx_d \approx \frac{|\Omega|}{N}\sum_{i=1}^{N} f\underbrace{(x_1^{(i)},\dots,x_d^{(i)})}_{\text{i-tý náhodný bod}}$$

v d-dimenzionální oblasti Ω

- porovnání s jinými metodami numerické integrace

  - obecně se chyba jisté metody (Newtonovy-Cotesovy vzorce apod.) chová jako $\mathcal{O}(h^k)$, kde h je bod° integrační krok pro jednorozměrný integrál, nebo typická vzdálenost x_i a x_{i+1}, a k je tzv. řád metody (např. $k=2$ pro lichoběžníkové pravidlo, nebo $k=4$ pro Simpsonovo pravidlo)

  - pokud takovou metodu použijeme pro vícerozměrnou integraci, pak potřebujeme $n^d = N$ bodů, kde d je dimenze a $n \sim \frac{1}{h}$ je počet bodů integrace v jedné dimenzi, chybu lze proto odhadnout jako $\mathcal{O}(h^k) \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^k}\right) \approx \mathcal{O}\left(\frac{1}{N^{k/d}}\right)$

  - odtud vidíme, že odhad chyby metody MC je srovnatelný, když $\frac{1}{N^{k/d}} \approx \frac{1}{N^{1/2}}$, neboli $\boxed{\frac{k}{d} \approx \frac{1}{2}}$

    a tedy pro $d \gtrsim 2k$ bude metoda MC srovnatelná nebo lepší, pro lichoběžníkové pravidlo dostaneme $d \gtrsim 4$ a pro Simpsona $d \gtrsim 8$ apod.

- chyba závisí na varianci f, tedy na σ_f

  - pokud je $f(x)$ skoro konstantní, pak je σ_f velmi malá (extrémní případ je $f(x)=c$ a $\sigma_f = 0$) a metoda MC funguje velmi dobře

  - naopak, pokud je σ_f velká (např. je-li $f(x)$ lokalizovaná na relativně malém podintervalu intervalu $\langle a,b \rangle$) tak i chyba bude větší

  - ovšem často lze zvýšit přesnost snížením σ_f pomocí vhodné váhové funkce $w(x)$, pro kterou platí $w(x) > 0$ na $\langle a,b \rangle$ (či Ω) a

$$\int_a^b w(x)\,dx = 1 \quad (\Omega)$$

, která je „podobná" funkci $f(x)$ (typicky je maximální tam, kde $f(x)$ apod.)

- přepišme

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \int_a^b \frac{f(x)}{w(x)}\, w(x)\,dx = \int_0^1 g(y)\,dy$$

kde $y(x) = \int_a^x w(t)\,dt$, $dy = w(x)\,dx$, $g(y) = \frac{f(x(y))}{w(x(y))}$

$y(a) = 0$, $y(b) = 1$

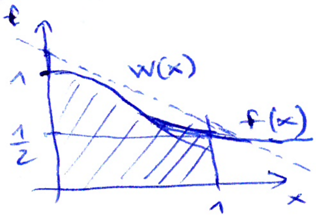
a aproximujme

$$I \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} g(y_i)$$ s rovnoměrně rozděleným y_i na $\langle 0, 1)$

chyba bude výrazně menší, pokud $\sigma_g \ll \sigma_f$

- ovšem problém představuje inverze funkce $y(x)$, což je vlastně kumulativní distribuční funkce pro $w(x)$, kterou obecně nelze vyjádřit v uzavřené formě

Př.



pro $f(x) = \frac{1}{1+x^2}$ lze použít $w(x) = \frac{4}{3} - \frac{2}{3}x$ (normalizovaná)

a tedy $y(x) = \frac{1}{3}x(4-x)$

z čehož $x(y) = 2 - \sqrt{4-3y}$

tímto postupem snížíme chybu MC integrace funkce $f(x)$ o jeden řád!

- pokud nemůžeme $y(x)$ invertovat, lze stále použít váhu $w(x)$, ale aproximujeme

$$I = \int_a^b \frac{f(x)}{w(x)}\, w(x)\,dx \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_i)}{w(x_i)}$$

ovšem nyní musíme generovat náhodné x_i tak, aby pravděpodobnostní rozdělení odpovídalo $w(x)$ splňující $\int_a^b w(x)\,dx = 1$

pokud $w(x)$ není normalizované, tj. $\int_a^b w(x)\,dx = A$, pak musíme použít $I \approx \frac{A}{N} \sum_{i=1}^{N} \frac{f(x_i)}{w(x_i)}$